На правах рукописи

Капорин

КАПОРИН Игорь Евгеньевич

ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИЕ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

01.01.07 — Вычислительная математика

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени

доктора физико-математических наук

Москва — 2011

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Вычислительном центре им. А. А. Дородницына РАН

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор Ильин Валерий Павлович

доктор физико-математических наук,

Жуков Виктор Тимофеевич

доктор физико-математических наук,

Нечепуренко Юрий Михайлович

Ведущая организация: Казанский (Приволжский) федеральный университет

Защита состоится "28" октября 2011 г. в 15 ч. 00 мин. на заседании Диссертационного совета Д 002.045.01 при Учреждении Российской академии наук Институте вычислительной математики РАН по адресу: 119333, г. Москва, ул. Губкина, 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института вычислительной математики РАН.

Автореферат разослан "23" сентября 2011 г.

Учёный секретарь Диссертационного совета

доктор физико-математических наук Бочаров Г.А.

0-789920

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Исторический обзор. Преимущества итерационных методов при численном решении систем линейных уравнений с разреженными матрицами специального вида были замечены достаточно давно, по крайней мере с середины 20-го века. Тогда же был отмечен единственный их недостаток: медленная сходимость итерационных приближений к искомому решению, причем как раз для тех задач, которые наиболее актуальны.

Двумя существенными шагами в развитии итерационных алгоритмов решения систем линейных уравнений с симметричной положительно определенной матрицей стали

(а) разработка Хестенсом и Штифелем в 1952 году[1] метода сопряженных градиентов, который, в свою очередь, тесно связан с алгоритмом тридиагонализации, опубликованным Ланцошем в 1950 году;[2]

(б) разработка техники предобусловливания для итерационных методов (которая эквивалентна предварительному линейному преобразованию матрицы системы), сформулированной в связи с ускорением метода сопряженных градиентов в работах Даниэля 1967 года,[3] Г. И. Марчука и Ю. А. Кузнецова 1968 года,[4] О. Аксельсона[5] и др.

В основном, теория предобусловленного метода сопряженных градиентов развивалась вокруг оценок *отношения границ спектра* (т.наз. спектрального числа обусловленности) предобусловленной матрицы, что порождало соответствующие критерии качества предобусловливания.

[1] M. R. Hestenes and E. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Research Nat. Bur. Standards*, 49 (1952) 409–436.

[2] C. Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential integral operators. *J. Research Nat. Bur. Standards*, 45 (1950) 255–282.

[3] J. W. Daniel. The conjugate gradient method for linear and nonlinear operator equations. SIAM J. Numer. Analysis, 4 (1967) 10–26.

[4] Г. И. Марчук, Ю. А. Кузнецов. Об оптимальных итерационных процессах. Докл. Акад. Наук СССР, т.181, №6 (1968) 1331–1334.

[5] O. Axelsson. A class of iterative methods for finite element equations. *Computer Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 9 (1976) 123–137.

Это означало, что не только в теорию, но и в построение методов решения систем линейных уравнений в той или иной мере вовлекалась проблема, гораздо более сложная по сравнению с исходной, а именно, обобщенная задача на собственные значения. При этом требуется решить последнюю задачу не в прямой, а в обратной постановке, то есть выбрать параметры предобусловливающей матрицы из условия минимума отношения крайних собственных значений.

Естественно, что по мере усложнения актуальных прикладных задач, такая ситуация вылилась в несоответствие между реально применяемыми алгоритмами, доказавшими свою практическую эффективность (однако зачастую не имеющими достаточно строгого обоснования), и теми конструкциями, которые хотя и допускали получение аналитических верхних границ числа итераций для некоторых модельных проблем (т.е. имели теоретическое обоснование), однако, будучи реализованы в виде алгоритма, оказывались пригодны лишь для довольно ограниченного круга реальных задач.

Кроме того, укажем на целесообразность учета дополнительных свойств спектра предобусловленных матриц, характеризующих неравномерность распределения собственных значений внутри границ спектра. Такие свойства спектра, очевидно, не связаны непосредственно со спектральным числом обусловленности (для метода сопряженных градиентов, критически важным является не только малость этого числа обусловленности, но и *разреженность спектра собственных значений с левого конца и его уплотнение с правого*[6]).

Отметим первые попытки разработки нестандартных подходов к предобусловливанию метода сопряженных градиентов, см., напр., [1, 2], а также недавний обзор,[7] которые опирались на критерий качества предобусловливания, выбранный в виде евклидова расстояния $\|I_n - M\|_F$ в $\mathbf{R}^{n^2}$ от предобусловленной матрицы M до единичной I_n. Однако, такому подходу присущи серьезные ограничения, делающие его непрактичным

[6]O. Axelsson and G. Lindskog. On the rate of convergence of the preconditioned conjugate gradient method, Numer. Math. 48, (1986) 499–523.

[7]T. Huckle. Factorized Sparse Approximate Inverses for Preconditioning, The Journal of Supercomputing v.25, no.2 (2003) 109–117.

во многих важных ситуациях, см. напр., обсуждение в работе [26]. В последней работе содержится законченная теория сходимости метода обобщенных минимальных невязок в терминах величины $\|I_n - M\|_F$ и дополнительного параметра, характеризующего отделение спектра M от нуля. Однако, в контексте разреженных матриц большого размера, не представляется реалистичной постановка задачи о минимизации $\|I_n - M\|_F$ при условии, например, ограниченности $\|M^{-1}\|$.

Таким образом, практическая потребность в *конструктивных* методах построения эффективных предобусловливаний закономерно приводит к необходимости разработки альтернативных подходов к оценке качества предобусловливаний метода сопряженных градиентов.

На этом же пути целесообразен поиск и разработка методов предобусловливания, ориентированных на естественные достаточно широкие классы разреженных матриц независимо от частностей (относящихся, например, к специфике значений ненулевых элементов и структуры разреженности), которые связаны со свойствами математических моделей и физических объектов, стоящих за этими матрицами. Таким образом, ставится важнейшая практическая задача о разработке не только эффективных, но и достаточно универсальных алгоритмов решения больших разреженных систем линейных уравнений, приближающихся к способности работать в режиме "черного ящика".

Цель работы. В качестве целей работы можно указать решение следующих проблем:

1. Определение подходящего альтернативного числа обусловленности, способного учитывать не столько отношение крайних собственных значений, сколько интегральные свойства спектра, и не связанного, таким образом, с отдельно взятыми собственными значениями предобусловленной матрицы.

2. Построение неулучшаемых оценок числа итераций метода сопряженных градиентов в терминах этого числа обусловленности.

3. Выявление известных и построение новых предобусловливаний, которые являются оптимальными (или близки к таковым) с точки

зрения нового числа обусловленности.

4. Теоретическая проверка вновь построенных предобусловливаний с точки зрения классической теории (основанной на уменьшении отношения границ спектра предобусловленной матрицы).

5. Алгоритмизация новых предобусловливаний (в том числе, пригодных для реализации на высокопараллельных компьютерах) и практическая проверка их вычислительной эффективности на представительных тестовых задачах.

Актуальность темы. Решение линейных систем с разреженными (в том числе симметричными положительно определенными) матрицами большой размерности часто возникает как повторяющаяся (и при этом доминирующая по трудоемкости) подзадача в алгоритмах, реализующих самые разнообразные прикладные расчеты. Примером могут служить задачи математической физики, задачи построения сеток, задачи оптимизации и многие другие.

Довольно стандартной является ситуация, когда требуется решить серию линейных задач, соответствующих вычислению ньютоновских направлений для итерационного решения нелинейной задачи. При этом свойства возникающих матриц Якоби не всегда вполне предсказуемы, и требования к надежности алгоритмов решения линейных систем в этом случае возрастают.

С другой стороны, быстрое развитие вычислительной техники предъявляет особые требования к алгоритмам решения; так, под оптимизацией алгоритма, помимо привычного сокращения числа операций и объема памяти, может подразумеваться и выявление или построение структуры вычислений, облегчающей эффективную работу компьютеров с иерархической системой памяти и/или параллельной организацией вычислений.

Таким образом, в условиях взаимообусловленного роста вычислительных мощностей и усложнения постановок прикладных задач, общая проблема построения "наилучшего" метода решения больших разреженных систем линейных уравнений все еще остается далекой от окончательного решения (даже если ограничиться задачами с симметричной положительно определенной матрицей).

Следует признать, что несмотря на усилия многочисленных исследователей на протяжении десятков лет, теоретические основы такого важного направления, как построение эффективных предобусловливаний для естественных классов матриц, остаются недостаточными для практического решения ряда важных задач. Это и обусловило актуальность темы диссертации.

Научная новизна. В диссертации разработан новый критерий эффективности продобусловливаний для метода сопряженных градиентов. Критерий является конструктивным, что позволило получить как новые варианты известных алгоритмов, так и разработать новые алгоритмы, еще более эффективные в определенных условиях. К основным новым результатам можно отнести следующие:

1. Предложен и исследован новый критерий эффективности предобусловливания, сформулированный в терминах минимизации матричного функционала (выражающегося через след матрицы и ее определитель), называемого далее К-числом обусловленности. Этот термин был введен О.Аксельсоном и использован в его известной монографии,[8] где обширно цитированы некоторые результаты настоящей диссертации.

2. В терминах К-числа обусловленности получена новая оценка числа итераций метода сопряженных градиентов, неулучшаемая в том же смысле, что и известная оценка через спектральное число обусловленности. Кроме того, новая оценка сходимости устанавливает сверхлинейную скорость сходимости, в отличие от известной оценки, которая указывает только на линейную сходимость итераций метода сопряженных градиентов.

3. Рассмотрены наиболее эффективные из известных приближенных треугольных разложений, выявлена их принадлежность к новому классу треугольных разложений 2-го порядка, осуществлен анализ

[8] O. Axelsson. *Iterative solution methods.* Cambridge University Press, Cambridge, 1994.

как с точки зрения оптимизации как спектрального числа обусловленности, так и К-числа обусловленности.

4. С точки зрения оптимизации К-числа обусловленности проанализированы наиболее эффективные из известных явных предобусловливаний, фактически являющихся приближенными обратными треугольными разложениями. Найдена блочно-неявная форма представления таких предобусловливателей, позволяющая избавиться от чрезмерных вычислительных затрат исходного разложения без потери параллелизуемости. Определен способ включения обычных приближенных треугольных разложений в блочную структуру метода, обоснована общая эффективность такого подхода.

5. С точки зрения оптимизации К-числа обусловленности проанализированы полиномиальные предобусловливания метода сопряженных градиентов, получены теоретические объяснения того известного факта, что точная оптимизация таких предобусловливаний по критерию минимума спектрального числа обусловленности, как правило, приводит к недостаточно эффективным вычислительным алгоритмам.

6. С точки зрения оптимизации К-числа обусловленности проанализированы известные высокопараллельные предобусловливания, связанные с малоранговой коррекцией. Построены новые формулы таких предобусловливаний, а также выполнен их дополнительный анализ с точки зрения спектрального числа обусловленности. Показана совместимость предобусловливания посредством малоранговой модификации с другими предобусловливаниями, что позволяет существенно повышать эффективность известных методов.

Теоретическая и практическая ценность. Теоретическая ценность диссертации заключается в разработке новой теории сходимости метода сопряженных градиентов, а также непосредственно связанного с ней общего подхода к оптимизации предобусловливаний. Кроме того, получен ряд важных частных теоретических результатов, отвечающих конкретным структурам предобусловливающих матриц.

Практическая ценность полученных результатов заключается в построении конкретных алгоритмов решения систем с разреженными положительно определенными матрицами общего вида, обладающих повышенной надежностью, высокой производительностью на последовательных компьютерах, а также хорошей параллелизуемостью.

В частности, разработаны эффективные параллельные методы решения систем линейных уравнений с симметричными положительно определенными матрицами, способные работать с разреженными и плохо обусловленными матрицами, которые могут быть использованы во многих промышленных приложениях.

Методы исследования. В диссертации применяются методы линейной алгебры, теории матриц, а также теории функций вещественных переменных. Использована как известная теория итерационных методов в симметризуемом случае, основанная на оценках спектрального числа обусловленности матрицы, так и разработанный в диссертации ее аналог, основанный на использовании К-числа обусловленности.

Положения, выносимые на защиту:

1. Новая теория сходимости метода сопряженных градиентов, основанная на использовании К-числа обусловленности, и связанный с ней подход к построению предобусловливаний, основанный на минимизации К-числа обусловленности.

2. Теория предобусловливания симметричных положительно определенных матриц посредством приближенных треугольных разложений 2-го порядка, с обоснованием как через К-число обусловленности, так и в терминах спектрального числа обусловленности.

3. Теория предобусловливания симметричных положительно определенных матриц посредством *обратных* приближенных

треугольных разложений, с использованием блочности, а также внутриблочной аппроксимации, с обоснованием в терминах K-числа обусловленности.

4. Теоретическое объяснение несоответствия точной оптимизации спектрального числа обусловленности и получаемого качества полиномиального предобусловливания, полученное на основе анализа K-числа обусловленности; отыскание параметризации чебышевского многочлена, обеспечивающего близкое к оптимальному качество предобусловливания.

5. Теория предобусловливания симметричных положительно определенных матриц посредством K-оптимальной малоранговой модификации, с обоснованием как через K-число обусловленности, так и в терминах спектрального числа обусловленности.

Обоснованность и достоверность результатов. Представленные в диссертации результаты имеют строгое математическое обоснование. С другой стороны, достоверность эффективности построенных предобусловливаний подтверждается прямым сравнением результатов расчетов с результатами, полученными при использовании других стандартных предобусловливаний: например, точечного метода Якоби, приближенного блочного метода Якоби. Кроме того, для ряда задач из коллекции университета Флориды, использовавшихся другими авторами для проверки разработанных ими алгоритмов, были получены существенно лучшие результаты.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на международной конференции “PaCT99” (Санкт-Петербург, Россия, 1999 г.), всемирном 16-ом Конгрессе “IMACS 2000” по научным вычислениям, прикладной математике и моделированию (Лозанна, Швейцария, 2000), Голландско-российском симпозиуме NWO (МГУ, Москва, июнь 2000), Симпозиуме NWO (Амстердам-Ниймеген, Голландия, ноябрь 2000), Втором Международном научно-практическом Семинаре и Всероссийской молодежной школе “Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах” (Нижний Новгород, Россия, 2002), международной конференции “Parallel CFD 2003” (Москва, 2003), Международной конференция “VIII Забабахинские научные чтения” (РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, Россия, 2005), международной конференции по вычислительной геометрии, генерации сеток и научным вычислениям “NUMGRID2008” (ВЦ РАН, Москва, 2008), международной конференции по вычислительной геометрии, генерации сеток и высокопроизводительным вычислениям “NUMGRID2010” (ВЦ РАН, Москва, 2010), международной конференции по матричным методам в математике и приложениях “MMMA-2011” (ИВМ РАН, Москва, 2011), научно-исследовательских семинарах Вычислительного центра РАН и Института вычислительной математики РАН, рабочих семинарах ExxonMobil Upstream Research Co. (Хьюстон, США).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 28 работ, из них 5 в отечественных рецензированных изданиях, рекомендованных ВАК, 8 в международных рецензируемых изданиях из рекомендованного ВАК списка “Web of Science: Science Citation Index Expanded” (база по естественным наукам), 2 в других международных рецензируемых изданиях, 1 в российском рецензируемом издании, 4 в трудах всероссийских конференций, 5 в трудах международных конференций, 3 публикации в других научных изданиях. (список работ приводится в конце автореферата).

В совместных работах [15, 19, 22, 24, 25, 27, 28] И.Н.Коньшину принадлежит общая схема параллельной реализации метода и описание численных экспериментов, а автору диссертации - разработка и исследование предобусловливания.

Благодарности. Автор выражает благодарность А. Ю. Еремину, привлекшему автора к работе по теме диссертации, Л. Ю. Колотилиной за внимание к работе и ценные обсуждения, профессору О. Аксельсону за интерес к работе и всестороннюю ее поддержку на протяжении многих лет, И. Н. Коньшину за длительное сотрудничество в области численного тестирования и параллельной реализации разработанных автором методов, В. А. Гаранже за полезные обсуждения, замечания и поддержку работы, В. Ю. Правильникову за сотрудничество в области

практической реализации и внедрения разработок по теме диссертации, академику РАН Ю. Г. Евтушенко и член-корреспонденту РАН Е. Е. Тыртышникову за внимание к работе и ее поддержку. Особенную ценность имели обсуждения материала главы 4 с О. Ю. Милюковой и Ю. В. Василевским, касающиеся оценок вычислительной эффективности предложенных автором методов.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, заключения и списка литературы. Объем работы 216 страниц. Список литературы включает 192 наименования.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение содержит краткий исторический обзор и постановку задачи, обоснование актуальности исследуемой проблемы, формулировку цели и задач диссертационной работы, перечисление полученных в диссертации новых результатов, их практической ценности, положений, выносимых на защиту и описание структуры диссертации.

Первая глава содержит изложение теории нового числа обусловленности

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}(M) = \left(\frac{1}{n}\operatorname{trace}(M)\right)^n \Big/ \det(M) \tag{1}$$

далее называемого K-числом обусловленности. Указанный матричный функционал определяется для вещественной симметризуемой матрицы M (т.е., существует невырожденная матрица T такая, что $M = TST^{-1}$, где S - симметричная положительно определенная матрица). Проводится детальное сопоставление K-числа обусловленности со стандартным спектральным числом обусловленности

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}(M) = \lambda_{\max}(M)/\lambda_{\min}(M). \tag{2}$$

Напоминаются или выводятся вновь важные свойства этих чисел обусловленности, прежде всего связанные с оценками сходимости метода сопряженных градиентов, применяемого для решения системы линейных алгебраических уравнений (с.л.а.у.) $Mx = b$ с симметричной положительно определенной (с.п.о.) разреженной $n \times n$-матрицей M. Рассматривается стандартный метод сопряженных градиентов (м.с.г.):

$$r_0 = b - Mx_0, \quad p_0 = r_0; \qquad i = 0, 1, \dots :$$

$$\alpha_i = \frac{r_i^T r_i}{p_i^T M p_i}, \quad x_{i+1} = x_i + p_i\alpha_i, \quad r_{i+1} = r_i - Mp_i\alpha_i, \tag{3}$$

$$\beta_i = \frac{r_{i+1}^T r_{i+1}}{r_i^T r_i}, \quad p_{i+1} = r_{i+1} + p_i\beta_i.$$

Здесь x_i и $r_i = b - Mx_i$ есть приближение к решение и невязка на i-й итерации, соответственно. Хорошо известная оценка убывания M^{-1}-нормы невязки, где $\|r\| = \sqrt{r^T M^{-1} r}$, имеет вид

$$\frac{\|r_i\|_{M^{-1}}}{\|r_0\|_{M^{-1}}} \le 2 \Bigg/ \left(\left(\frac{\sqrt{\mathbf{C}(M)} + 1}{\sqrt{\mathbf{C}(M)} - 1} \right)^i + \left(\frac{\sqrt{\mathbf{C}(M)} - 1}{\sqrt{\mathbf{C}(M)} + 1} \right)^i \right), \tag{4}$$

где $\mathbf{C}(M)$ определено выше в (2). Понятно, что уменьшению $\mathbf{C}(M)$ отвечает более быстрое убывание верхней границы M^{-1}-нормы невязки.

Следует, однако, отметить недостаточную согласованность оценки (4) с реальной скоростью сходимости м.с.г., которая существенно зависит не только от отношения границ спектра, но и от характера распределения собственных значений матрицы M внутри этих границ.

Новая теория сходимости м.с.г., использующая предложенное в работах [3, 4] K-число обусловленности (1), основывается на верхней границе евклидовой нормы невязки $\|r_i\| = \sqrt{r^T r}$ вида

$$\frac{\|r_i\|}{\|r_0\|} \le \left(\mathbf{K}(M)^{1/i} - 1 \right)^{i/2}. \tag{5}$$

Окончательный вид этой оценки был установлен в работах [8, 11], где была также доказана ее неулучшаемость в том же смысле, в котором это справедливо для стандартной оценки (4).

Вторая глава продолжает изложение теории метода сопряженных градиентов (м.с.г.), для решения с.л.а.у. $Ax = b$. а также практики его применения. Особое внимание уделяется предобусловленному варианту м.с.г., позволяющему значительно повысить его вычислительную эффективность. Если с.п.о. матрица $H \sim A^{-1}$ выбрана в качестве предобусловливателя для матрицы A, то этот метод описывается следующими формулами:

$$r_0 = b - Ax_0, \quad p_0 = Hr_0; \qquad i = 0, 1, \ldots :$$

$$\alpha_i = \frac{r_i^T H r_i}{p_i^T A p_i}, \quad x_{i+1} = x_i + p_i \alpha_i, \quad r_{i+1} = r_i - A p_i \alpha_i, \tag{6}$$

$$\beta_i = \frac{r_{i+1}^T H r_{i+1}}{r_i^T H r_i}, \quad p_{i+1} = H r_{i+1} + p_i \beta_i.$$

Важным новым результатом, содержащимся в этой главе, является (упрощенная) оценка числа итераций метода сопряженных градиентов, достаточного для уменьшения H-нормы начальной невязки в ε^{-1} раз через К-число обусловленности

$$i_{\mathbf{K}}(\varepsilon) = \left\lceil \log_2 \mathbf{K}(HA) + \log_2 (\varepsilon^{-1}) \right\rceil . \tag{7}$$

которую можно соотнести со стандартной оценкой числа итераций

$$i_{\mathbf{C}}(\varepsilon) = \left\lceil \frac{1}{2} \sqrt{\mathbf{C}(HA)} \log (2\varepsilon^{-1}) \right\rceil . \tag{8}$$

Основными недостатками критерия качества предобусловливания, основанного на оценке (8) и связанного с минимизацией спектрального числа обусловленности $\mathbf{C}(HA)$, является как проблематичность его непосредственного практического использования в сколько-нибудь общем случае (например, при построении предобусловливаний для произвольной с.п.о. матрицы), так и его недостаточная согласованность с реальной скоростью сходимости м.с.г., особенно в условиях действия вычислительной погрешности[9]. Поэтому в заключение главы формулируется основной тезис диссертации, выносимый на защиту, а именно, вывод о целесообразности построения предобусловливателя H исходя из условия минимизации К-числа обусловленности $\mathbf{K}(HA)$ (или его верхней оценки) при ограничениях, накладываемых структурой предобусловливателя H.

[9] Y. Notay. On the convergence rate of the conjugate gradients in presence of rounding errors. Numer. Math. v.65 (1993) 301-317.

Третья глава содержит описание известного своей эффективностью класса предобусловливаний, отвечающих приближенным симметричным треугольным разложениям произвольных с.п.о. матриц $A \approx U^T U$. Основное внимание уделяется алгоритмам разложений с отсечением малых элементов по значениям. Доказывается следующий важный результат, устанавливающий верхнюю границу заполнения приближенного множителя U для широкого класса алгоритмов факторизации.

Теорема 1 [12]. *Пусть $A = A^T > 0$ и $Diag(A) = I_n$, и пусть при некотором $0 < \delta \ll 1$ выполнены условия структурной устойчивости*

$$\mathrm{trace}(U^T U - A) \le n\delta, \qquad \det(U^T U) \ge \det A.$$

Тогда из условия отсечения

$$|(U)_{i,j}| \ge \tau, \qquad j > i,$$

следует оценка заполнения

$$\mathrm{nz}(U) \le n \left(1 + \frac{\delta + 1 - \mathbf{K}(A)^{-1/n}}{\tau^2}\right),$$

являющаяся асимптотически неулучшаемой при малых τ, δ и больших $n, \mathbf{K}(A)$.

Анализ последних достижений в области построения приближенных треугольных разложений, прежде всего алгоритма Тисменецкого,[10] и его более практичной приближенной версии,[11] привел к следующей матричной формулировке [12], которая позволила не только дать теоретическое обоснование соответствующему предобусловливанию, но и сформулировать понятие приближенного треугольного разложения *второго порядка*:

$$A = U^T U + U^T E_1 + E_1^T U - E_2 \tag{9}$$

[10] M. Tismenetsky. A new preconditioning technique for solving large sparse linear systems. Linear Algebra Appls. v.154-156 (1991) 331-353.

[11] M. Suarjana and K. H. Law. A robust incomplete factorization based on value and space constraints. Int. J. Numer. Methods Engrg. v.38 (1995) 1703-1719.

Здесь U – невырожденная верхняя треугольная матрица (используемая как приближение правого множителя U_0 точного треугольного разложения $A = U_0^T U_0$ для матрицы A), E_1 – строго верхняя треугольная матрица погрешности с относительно малыми по модулю элементами, и E_2 – симметричная неотрицательно определенная матрица погрешности с элементами, существенно меньшими по сравнению с E_1.

Принципиальным преимуществом такого разложения (9) (при выборе $E_1 = O(\tau)$, $E_2 = O(\tau^2)$) является тот факт, что при той же нижней границе на модули ненулевых элементов U (а тогда и сопоставимой верхней границе ее заполнения $\mathrm{nz}(U)$, см. выше Теорему 1), точность приближения оказывается на порядок лучше в смысле зависимости от числа обусловленности матрицы A:

$$\mathbf{C}(U^{-T}AU^{-1}) = 1 + O(\tau\sqrt{\mathbf{C}(A)} + \tau^2\mathbf{C}(A)), \quad \log\mathbf{K}(U^{-T}AU^{-1}) \leq c_2(A)\tau^2,$$

тогда как для схемы типа Дженнингса-Малика,[12] см. также[13] (где $E_1 = 0$, $E_2 = O(\tau)$) имеем гораздо более слабую оценку

$$\mathbf{C}(U^{-T}AU^{-1}) = 1 + O(\tau\mathbf{C}(A)), \quad \log\mathbf{K}(U^{-T}AU^{-1}) \leq c_1(A)\tau.$$

Рекуррентные соотношения для вычисления приближенного треугольного разложения могут быть получены непосредственно из (9), например, если потребовать, чтобы в структуре разреженности матриц U и E_1 не было совпадающих позиций ненулевых элементов и чтобы значения этих ненулевых элементов удовлетворяли соотношениям $|(U)_{ij}| \geq \tau$ и $|(E_1)_{ij}| < \tau$ соответственно. Здесь $0 < \tau \ll 1$ представляет собой малый параметр, определяющий качество разложения (будем также называть τ *параметром отсечения* малых элементов в приближенном треугольном разложении).

Оценки спектрального числа обусловленности, получаемые при использовании предобусловливания, соответствующего приближенному треугольному разложению 2-го порядка, устанавливает

[12]A. Jennings and G. M. Malik. Partial elimination. J. Inst. Math. Appl., 20, 307-316, 1977.
[13]M. A. Ajiz and A. Jennings. A robust incomplete Choleski-conjugate gradient algorithm. Int. J. Numer. Methods Engrg., 20, 949-966, 1984.

Теорема 2 [12]. *Пусть в тождестве (9) матрицы удовлетворяют следующим условиям: U - верхняя треугольная с положительной диагональю, E_1 - строго верхняя треугольная,*

$$A = A^T > 0, \qquad E_2 = E_2^T \geq 0, \qquad E_1^T E_1 \leq \gamma E_2,$$

$$\|E_1 A^{-1} E_1^T\| \leq \alpha, \qquad \|A^{-1/2} E_2 A^{-1/2}\| \leq \beta,$$

Тогда справедливы оценки

$$\lambda_{\min}(U^{-1}AU^{-T}) \geq \left(\sqrt{\alpha} + \sqrt{1+\alpha+\beta}\right)^{-2}, \qquad \lambda_{\max}(U^{-1}AU^{-T}) \leq 1+\gamma.$$

$$\mathbf{C}(U^{-1}AU^{-T}) \leq (1+\gamma)\left(\sqrt{\alpha} + \sqrt{1+\alpha+\beta}\right)^{2}.$$

Результаты, полученные в этом случае при оценке K-числа обусловленности, дает

Теорема 3 [12]. *Пусть в тождестве*

$$A = U^T U + U^T E_1 + E_1^T U - E_2,$$

матрицы удовлетворяют следующим условиям: U - верхняя треугольная с положительной диагональю, E_1 - строго верхняя треугольная,

$$A = A^T > 0, \qquad E_2 = E_2^T \geq 0,$$

Тогда справедливы оценки

$$\mathbf{K}(U^{-1}AU^{-T}) \leq \det(A + E_1^T E_1 + E_2)/\det A,$$

$$\mathbf{K}(U^{-1}AU^{-T}) \leq \min_{\lambda > 0}\left(\frac{1}{\lambda}\mathrm{trace}(E_1^T E_1 + E_2) + \int\limits_0^{\lambda} \nu_A(t)\frac{dt}{t}\right),$$

где $\nu_A(t)$ представляет собой кусочно-постоянную неубывающую функцию, равную количеству собственных значений матрицы A, не превосходящих t.

Заметим, однако, что как вычисление (приближенная факторизация), так и применение (решение систем с матрицами

U^T и U) приближенного симметричного треугольного разложения в качестве предобусловливателя для всей матрицы A, не удается эффективно реализовать на параллельных архитектурах с большим числом процессоров и распределенной памятью.

Поэтому в заключение главы делается вывод о необходимости рассмотрения специальных алгоритмов предобусловливания, обладающих лучшей параллелизуемостью.

Четвертая глава содержит описание параллелизуемых методов предобусловливания симметричных положительно определенных матриц общего вида, основанных на использовании *неполных обратных треугольных* (н.о.т.) разложений.

Использование техники K-обусловленности для характеризации сходимости м.с.г. явилось непосредственным инструментом построения K-оптимального *аддитивного* приближения для обратной матрицы, которое может использоваться как эффективный и хорошо параллелизуемый предобусловливатель для метода сопряженных градиентов.

В качестве отправной точки построения используется *неполное обратное треугольное* разложение с.п.о. матрицы A, введенное в работах [3, 4]. Его можно записать как

$$GAG^T = I + E,$$

где G - нижняя треугольная разреженная матрица с ненулевой диагональю, а E - матрица погрешности. Позиции ненулевых элементов матрицы G предписываются заранее. Простейший выбор основан на включении в структуру разреженности матрицы G всех позиций ненулевых элементов нижнего треугольника матрицы A^q, $q = 1, 2, 3, \ldots$. Значения определяются из условия минимума $\mathbf{K}(GAG^T)$. Для этого достаточно выполнить n треугольных разложений подматриц A, построенных на индексных множествах ненулевых элементов каждой строки G. Такое предобусловливание будем обозначать IIC(q) (англ. Incomplete Inverse Cholesky).

Более совершенный алгоритм предусматривает построение усеченной структуры разреженности $\{(i,j)\}$ согласно критерию $|(G)_{i,j}| \geq \tau(G)_{i,i}$, где $0 < \tau << 1$, с последующим перевычислением матрицы G для этой структуры. При этом число итераций предобусловленного м.с.г. существенно не изменяется, а заполненность матрицы G может заметно уменьшиться. Такое предобусловливание будем обозначать IIC(q,τ).

Однако, несмотря на "идеальную" параллелизуемость алгоритмов н.о.т.-разложения, получаемый предобусловленный м.с.г. может иногда оказаться лишь ненамного более эффективным, чем в случае простейшего диагонального предобусловливания $H = (\mathrm{Diag}(A))^{-1}$.

Проблема в том, что для указанных "очевидных" реализаций неполного обратного треугольного разложения при увеличении количества ненулевых элементов матрицы G улучшение свойств матрицы GAG^T происходит гораздо медленнее, чем при сопоставимой степени заполнения в обычном приближенном треугольном разложении (и тем более в разложении 2-го порядка), см. [9]. Кроме того, слишком быстро растут затраты на вычисление и применение предобусловливателя G, см. далее Фиг.4.

Более эффективный подход описан в работах [4, 11], где был предложен *блочный* вариант метода неполного обратного треугольного разложения, позволивший в значительной мере преодолеть упомянутые недостатки простейшего н.о.т.-разложения.

Допустим, что в вычислениях будут использоваться p процессоров. Тогда матрица A переупорядочивается так, чтобы как можно больше ненулевых элементов оказались в ее блочно-диагональной части, состоящей из p квадратных блоков примерно одинакового размера.

В структуру разреженности матрицы G включим теперь все нижние треугольники блоков, а также все ненулевые столбцы блочных строк, включающие в себя ненулевые элементы степеней исходной матрицы A^q, $q = 1, 2, 3, \ldots$. Тогда, в силу совпадения блочно-внедиагональных структур заполненности, оказывается достаточным вычислить не n факторизаций подматриц, а только p из них (остальные вычисления избыточны).

Далее, совершенно необязательно вычислять указанные p (скорее всего, плотных) обратных треугольных множителей этих подматриц. Построенные блоки матрицы G можно хранить неявно, выражая их через стандартные треугольные факторизации выбранных p подматриц.

И, наконец, упомянутые факторизации блоков вовсе не обязаны быть точными, вместо них можно использовать их приближенные треугольные факторизации 2-го порядка с порогом отсечения τ, как это было предложено и реализовано в работах [15, 19, 22, 24, 25, 27, 28]. Такое предобусловливание будем обозначать BIIC(p,q)-IC2(τ) (Block Incomplete Inverse Cholesky - Incomplete Cholesky of the 2nd order).

В итоге, построенное предобусловливание не только весьма хорошо распараллеливается, но и по качеству сопоставимо с "непараллельным" приближенным треугольным разложением всей матрицы в целом.

Этот факт был проверен экспериментально в [15, 19] и обоснован теоретически в работе [22]. Дальнейшее развитие этот метод получил в работах [27, 28], где на основе специальных свойств треугольного разложения 2-го порядка был построен, обоснован и испытан метод улучшения балансировки вычислений по блокам такого предобусловливателя.

Приведем более детальное описание блочной версии неполного обратного треугольного разложения (BIIC) [4, 9, 11, 22]. Пусть матрица A переупорядочена и разбита на блоки тем же образом, что и в для известного блочно-диагонального предобусловливания (Block Jacobi, BJ), т.е., t-й диагональный блок симметрично переупорядоченной матрицы имеет размер n_t, где $n_1 + \cdots + n_p = n$. Здесь $t = 1, 2, \ldots, p$ и p – блочная размерность матрицы A. Для t-го диагонального блока определим "базисное" множество индексов как $\{k_{t-1}+1, \ldots, k_t\}$, где $k_{t-1} = n_1 + \cdots + n_{t-1}$ $(k_0 = 0,\ \ k_p = n)$, и введем "перекрывающиеся" множества индексов $\{j_t(1), \ldots, j_t(m_t - n_t)\}$, $j_t(p) \le k_{t-1}$. Для каждого t такое индексное множество, как правило, включает те индексы, не превосходящие k_t, которые оказываются связанными с t-м базисным множеством индексов, например, относительно структуры разреженности матрицы A^q (или q-й степени матрицы, полученной из

A заменой относительно малых элементов на нули). Здесь $m_t \geq n_t$ и $m_1 = n_1$, т.е. первое такое множество является пустым.

В этих обозначениях BIIC-предобусловливатель может быть записан в следующем аддитивном виде:

$$H = \sum_{t=1}^{p} V_t U_t^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_t} \end{bmatrix} U_t^{-T} V_t^T, \tag{10}$$

где V_t выбираются в виде прямоугольных матриц, столбцы которых являются единичными n-векторами с определенными выше индексами,

$$V_t = [e_{j_t(1)}|\cdots|e_{j_t(m_t-n_t)}|e_{k_{t-1}+1}|\cdots|e_{k_t}], \qquad t = 1, 2, \ldots, p, \tag{11}$$

а каждая верхнетреугольная матрица U_t является правым множителем Холецкого t-й "расширенной" диагональной $(m_t \times m_t)$-подматрицы $V_t^T A V_t$, т.е.

$$V_t^T A V_t = U_t^T U_t, \qquad t = 1, 2, \ldots, p. \tag{12}$$

В работах [4, 9, 10] показано, что BIIC-предобусловливатель H обладает свойством K-оптимальности в следующем смысле. Обозначим через G множество разреженных нижнетреугольных матриц, которые имеют ненулевые элементы только в позициях (i, j), где

$$j \in \{j_t(1), \ldots, j_t(m_t - n_t), k_{t-1} + 1, \ldots, i\}, \quad k_{t-1} + 1 \leq i \leq k_t, \tag{13}$$

при $t = 1, \ldots, p$. Тогда для построенного предобусловливателя справедливо представление $H = G^T G$, где

$$G = \arg\min_{G \in \mathsf{G}} \mathbf{K}(GAG^T)$$

(напомним, что имеет место тождество $\mathbf{K}(GAG^T) = \mathbf{K}(HA)$).

Далее рассматривается приближенный вариант BIIC-предобусловливания, получаемый заменой для каждого $t = 1, 2, \ldots, p$ точного $U^T U$-разложения (12) на соответствующее приближенное IC2-разложение, аналогичное (9):

$$V_t^T A V_t = \tilde{U}_t^T \tilde{U}_t + \tilde{U}_t^T R_t + R_t^T \tilde{U}_t. \tag{14}$$

где R_t – локальные матрицы ошибок с элементами $|r_{ij}| < \tau$. Обозначим

$$\tilde{H} = \sum_{t=1}^{p} V_t \tilde{U}_t^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_{n_t} \end{bmatrix} \tilde{U}_t^{-T} V_t^T,$$

и будем для простоты предполагать, что стратегия отсечения малых элементов выбрана таким образом, что первые $m_t - n_t$ диагональных элементов $\tilde{U}_t$ совпадают с соответствующими элементами U_t. С использованием этого предположения и изложенных выше свойств IC2- и BIIC-разложений, доказывается следующая

Теорема 4 *[22]. Пусть A является с.п.о. матрицей; тогда из свойств разложений $IC2(\tau)$ и $BIIC(p)$ вытекает следующая оценка отношения K-чисел обусловленности матриц $\tilde{H}A$ и HA:*

$$\frac{K(\tilde{H}A)}{K(HA)} = \prod_{t=1}^{p} \det\left(I_{m_t} + R_t (V_t^T A V_t)^{-1} R_t^T\right) \le \exp(c_0 \tau^2), \qquad (15)$$

где $0 < c_0 = c_0(A)$.

Таким образом, из (7) следует оценка числа итераций

$$\tilde{i}_{\mathbf{K}}(\varepsilon) = \left\lceil \log_2 \mathbf{K}(HA) + \log_2(\varepsilon^{-1}) + \frac{c_0(A)}{\log 2}\tau^2 \right\rceil. \qquad (16)$$

т. е., для некоторого достаточно малого значения параметра отсечения τ в IC2-разложениях блоков построенный BIIC-IC2-предобусловливатель $\tilde{H}$ имеет почти такую же оценку числа итераций м.с.г., что и K-оптимальное BIIC-предобусловливание (10). В то же время, BIIC-IC2-разложение требует значительно меньших затрат для вычисления, хранения и применения предобусловливателя по сравнению с "точным" BIIC-предобусловливанием (10), (см. [15]).

Численное тестирование описанных выше методов предобусловливания IIC(q), IIC(q;τ), BIIC(p;q)-IC2(τ) проводилось с использованием вещественной симметричной положительно определенной матрицы *apache2*, взятой из коллекции разреженных матриц университета Флориды[14]. Эта матрица, возникающая в

[14] T. A. Davis, Y .F .Hu Y. University of Florida sparse matrix collection. To appear in: ACM Trans. on Math. Software, 2011. V. 38; http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices

некоторой трехмерной конечно-разностной задаче, имеет достаточно большой размер и довольно плохо обусловлена: $n = 715176$, $\mathrm{nz}(A) = 4817870$, $\lambda_{\max}(A_S) = 2$, $\lambda_{\max}(A_S)/\lambda_{\min}(A_S) = 1.2 \cdot 10^6$, где $A_S = (\mathrm{Diag}(A))^{-1/2} A (\mathrm{Diag}(A))^{-1/2}$ представляет собой матрицу коэффициентов, симметрично масштабированную к единичной диагонали.

Итерации предобусловленного м.с.г. начинались с нулевого начального приближения $x_0 = 0$ и критерием их остановки служило условие $\|b - Ax_k\|_H \le 10^{-12}\|b\|_H$, где правая часть $b = Ax_*$ вычислялась посредством умножения матрицы A на вектор тестового решения $x_*(i) = 1, \quad i = 1, \ldots, n$.

Параметры предобусловливаний задавались следующим образом:

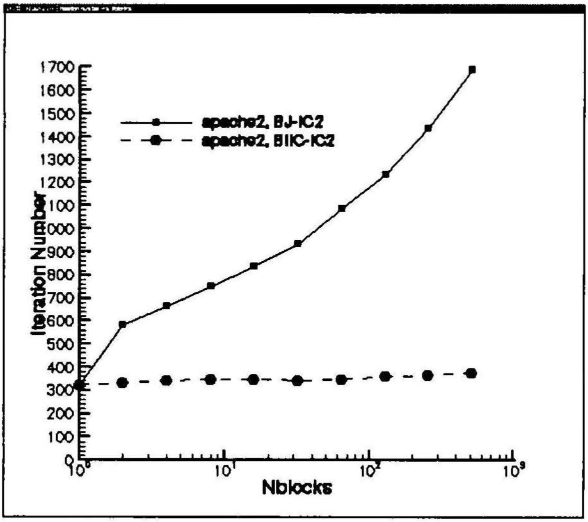
(а) для IIC(q) и IIC(q;τ)) использовалась перестановка исходной матрицы коэффициентов, уменьшающая среднюю ширину ленты матрицы; параметр отсечения выбирался равным $\tau = 0.01$;

(б) для BIIC(p;q)-IC2(τ)) использовалась перестановка исходной матрицы коэффициентов, обеспечивающая достаточно заполненную блочно-диагональную часть с почти совпадающими размерами блоков; для этого использовалась подходящая версия алгоритма PABLO[15]; значения параметров в методе приближенного треугольного разложения IC2 [12] выбирались равными $\tau = 0.01$, $\tau_2 = 0.0001$, $\sigma = 0$, $\theta = 0.1$;

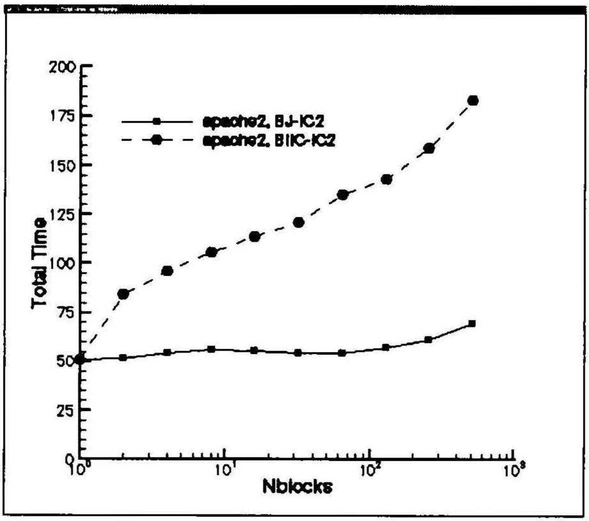
Расчеты проводились на настольном ПК AMD Athlon 64x2 Dual Core Processor 4200+ (2.21 GHz, память 2 Gbytes) под ОС *MS Windows XP v.2002 Service Pack 2* с компилятором *Intel Fortran Compiler 6.0 for Windows* и опциями компиляции **ifl /Ox /G6 /Qxi /Qip *.for**. Время счета приводится в секундах.

Фиг. 1 и 2 иллюстрируют результаты, полученные для числа блоков $p = 1, 2, 4, \ldots, 256, 512$ при использовании предобусловливаний BJ(p)-IC2(0.01) и BIIC(p;4)-IC2(0.01). Заметим, что для обоих методов случаю $p = 1$ отвечает один и тот же метод IC2(0.01)-CG, описанный в предыдущей главе.

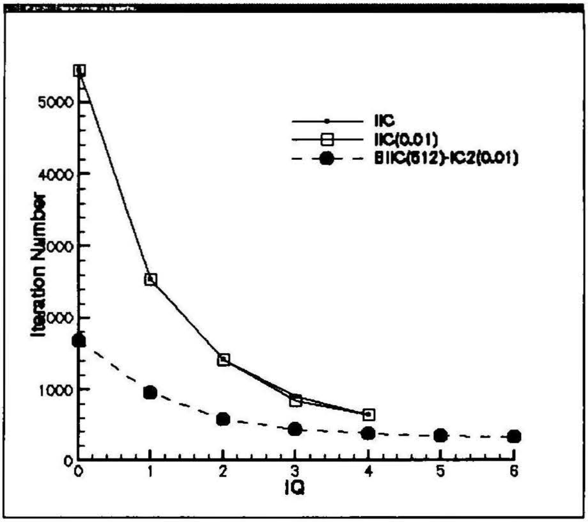
[15]D. Fritzsche, A. Frommer, and D. B. Szyld, Extensions of certain graph-based algorithms for preconditioning. SIAM Journal on Scientific Computing, v.29, no.5, (2007) 2144-2161.



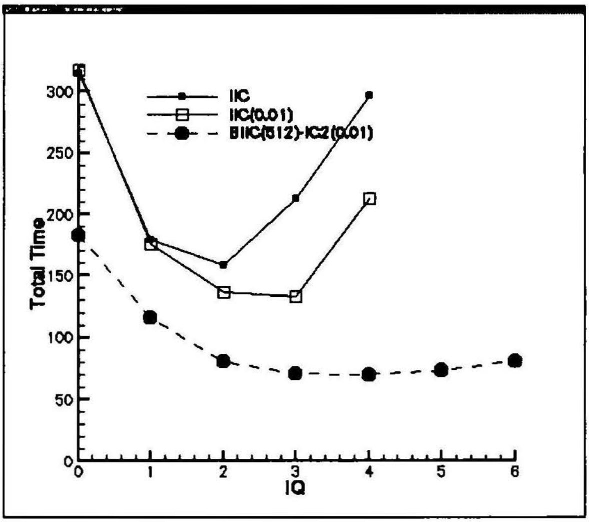
Фиг.1. Число итераций м.с.г. в зависимости от числа блоков для предобусловливаний BJ(p)-IC2(0.01) и BIIC(p;4)-IC2(0.01) и задачи *apache2*.



Фиг.2. Общее время счета м.с.г. в зависимости от числа блоков p для предобусловливаний BJ(p)-IC2(0.01) и BIIC(p;4)-IC2(0.01) и задачи *apache2*.



Фиг.3. Число итераций м.с.г. в зависимости от степени перекрытия q для методов IIC(q), IIC(q;0.01) и BIIC(512;q)-IC2(0.01) и задачи *apache2*.



Фиг.4. Общее время счета м.с.г. в зависимости от степени перекрытия q для методов IIC(q), IIC(q;0.01) и BIIC(512;q)-IC2(0.01) и задачи *apache2*.

Фиг. 1, показывает, что число итераций блочного метода Якоби довольно сильно возрастает при увеличении числа блоков (а это означает, что при параллельной реализации будет существенно снижаться показатель эффективности), в то время как для метода BIIC-IC2 число итераций практически не изменяется. Фиг. 2 показывает, что указанное соотношение почти в той же мере сохраняется и для времени счета (т.е., числа операций).

Замечание. *Наблюдаемый эффект независимости числа итераций м.с.г. при числе блоков до $p = 512$ объясняется тем, что возмущение, вносимое разделением на блоки, не только сравнительно невелико (так как является, в смысле K-оптимальности, минимально возможным), но и остается незаметным на фоне погрешности, вносимой приближенной факторизацией блоков. При этом с ростом p размеры блоков уменьшаются, их факторизация становится точнее, и при достаточно большом p уже начинается рост числа итераций за счет выявления возмущений, вносимых разделением на блоки. Если факторизацию блоков осуществлять* точно, *то, несомненно, рост числа итераций м.с.г., будет наблюдаться уже начиная с малых значений p.*

Фиг. 3 и 4 иллюстрируют результаты, полученные для разных значений степени перекрытия q от 0 до 6 при использовании предобусловливаний IIC(q), IIC(q;0.01) и BIIC(512;q)-IC2(0.01) соответственно. Заметим, что при $q = 0$ методы IIC(0) и IIC(0;0.01) сводятся к точечному предобусловливанию Якоби, а метод BIIC(512;0)-IC2(0.01) переходит в BJ(512)-IC2(0.01). При возрастании q происходит существенное сокращение числа итераций, но также и удорожание затрат на предобусловливание.

Согласно показанной на Фиг.3. зависимости числа итераций от степени перекрытия, при равных значениях q блочное предобусловливание требует существенно меньше итераций, чем точечные. С другой стороны, усовершенствованный алгоритм IIC(q;0.01) требует почти столько же или даже меньше итераций по сравнению с простейшим методом IIC(q) (который, как правило, использует избыточное количество ненулевых элементов для формирования матрицы G).

Зависимость времени счета от степени перекрытия качественно примерно одинакова для всех методов, см. Фиг.4. Здесь во всех случаях наблюдается выраженный оптимум по q (для методов IIC это $q = 2$ и для BIIC это $q = 4$). Однако количественно можно видеть заметное преимущество метода IIC(q;0.01) над IIC(q) (в полтора раза быстрее для $q = 3$ за счет существенного уменьшения заполненности предобусловливателя). В свою очередь, метод BIIC(512;3)-IC2(0.01) уменьшает время счета еще почти в два раза (по сравнению с IIC(3;0.01)).

Таким образом, для произвольной разреженной с.п.о. матрицы построено предобусловливание, сочетающее надежность и качество лучших из приближенных треугольных разложений с параллелизуемостью простых (но менее эффективных) блочных методов. Это утверждение и является выводом, сделанным в заключении главы.

Пятая глава представляет весьма наглядную иллюстрацию целесообразности применения К-оптимальных предобусловливаний метода сопряженных градиентов. В ней проведен теоретический анализ методов *полиномиального* предобусловливания $H = p_{d-1}(A)$ симметричных положительно определенных матриц A общего вида.

Для плохо обусловленных матриц с разреженным спектром в области наименьших собственных значений обнаруживается крайняя неэффективность оптимизации выбора предобусловливающего многочлена, исходя из стандартного условия минимизации спектрального числа обусловленности. матрицы. Напротив, выбор предобусловливающего многочлена в виде

$$p_{d-1}(t) = \left(1 - T_d\left(\frac{\Delta + \delta - 2t}{\Delta - \delta}\right) \Big/ T_d\left(\frac{\Delta + \delta}{\Delta - \delta}\right)\right) \Big/ t,$$

где $T_d(x) = ((x + \sqrt{x^2 - 1})^d + (x - \sqrt{x^2 - 1})^d)/2$ - многочлен Чебышева первого рода d-й степени,

$$0 < \lambda_{\min}(A) < \delta < \lambda_{\max}(A) \le \Delta, \qquad \frac{\delta}{\Delta} = \left(\frac{\ln d}{6d}\right)^2,$$

направленный на улучшение К-обусловленности, приводит к гораздо более эффективному предобусловливанию, позволяющему реструктурировать метод с целью улучшения параллелизуемости, при этом практически сохраняя общее число операций.

Шестая глава содержит описание методов предобусловливания произвольных симметричных положительно определенных матриц общего вида, основанных на использовании *малоранговой модификации*, где

$$H = I + CSC^T.$$

Здесь C - фиксированная $n \times m$-матрица полного столбцового ранга, причем $m \ll n$, а S - симметричная $m \times m$-матрица, определяемая из условия минимума $\mathbf{K}(HA)$. Указанная конструкция была предложена в [4] и изучена в [8], где было установлено, что К-оптимизация такого предобусловливания приводит к выбору

$$S = -(C^TC)^{-1} + \sigma(C^TAC)^{-1}, \tag{17}$$

при некотором значении $\sigma = \sigma(A, C)$. Для практического использования можно положить $\sigma = 1$.

Анализ получаемых верхних границ как для $\mathbf{K}(HA)$, так и для $\mathbf{C}(HA)$, приводит к одному и тому же заключению: линейная оболочка столбцов матрицы C должна достаточно хорошо аппроксимировать собственное подпространство матрицы A, отвечающее ее наименьшим собственным значениям.

Простая подстановка непосредственно приводит к обобщению полученной формулы в виде

$$H = B^{-1} + V\left(-(V^TBV)^{-1} + (V^TAV)^{-1}\right)V^T,$$

где в качестве матрицы B используется легко обратимая матрица, грубо приближающая A (напр., ее блочно-диагональная часть). Построенное предобусловливание имеет прямое отношение ко многим известным двух- и многоуровневым предобусловливаниям, позволяя дополнительно повысить их эффективность.

Заключение содержит следующие основные результаты диссертации.

1. Разработана новая теория сходимости метода сопряженных градиентов, основанная на использовании К-числа обусловленности.

2. Разработана теория предобусловливания симметричных положительно определенных матриц посредством приближенных треугольных разложений 2-го порядка, с обоснованием как через К-число обусловленности, так и в терминах спектрального числа обусловленности.

3. Разработана теория предобусловливания симметричных положительно определенных матриц посредством *обратных* приближенных треугольных разложений, в том числе с использованием блочности и внутриблочной аппроксимации, с обоснованием в терминах К-числа обусловленности.

4. С точки зрения теории оптимизации К-числа обусловленности рассмотрены полиномиальные предобусловливания, построена и обоснована параметризация чебышевского многочлена, приводящего к почти оптимальному качеству предобусловливания для важного класса с.п.о. матриц.

5. Разработана теория предобусловливания симметричных положительно определенных матриц посредством К-оптимальной малоранговой модификации, с обоснованием как через К-число обусловленности, так и в терминах спектрального числа обусловленности.

Основные публикации автора по теме диссертации:

[1] Еремин А.Ю., Капорин И.Е. Спектральная оптимизация явных итерационных методов. I // В кн.: Численные методы и вопросы организации вычислений, вып. 7, Зап. научн. семин. ЛОМИ АН СССР, 1984, т.139, С.51–60.
(перевод: A. Yu. Eremin and I. E. Kaporin, Spectral optimization of explicit iterative methods. I. Journal of Mathematical Sciences, 1987, V.36, no.2, P.207–214)

[2] Еремин А.Ю., Капорин И.Е., Марьяшкин Н.Я. Решение линейных систем большой размерности на векторных и конвейерных супер-ЭВМ: новый подход к оптимизации явных итерационных методов //

В кн.: Вопросы кибернетики. Конвейеризация вычислений. (под ред. О.М.Белоцерковского и В.В.Щенникова), Научный совет АН СССР по комплексной проблеме "Кибернетика", Москва, 1986, С.114–124.

[3] Капорин И.Е. Альтернативный подход к оценке числа итераций метода сопряженных градиентов // В кн.: Численные методы и программное обеспечение (под ред. Ю. А. Кузнецова) - М.: ОВМ АН СССР, 1990, С.55–72.

[4] Капорин И.Е. Предобусловленный метод сопряженных градиентов для решения дискретных аналогов дифференциальных задач // Дифференциальные уравнения, 1990, Т.26, №7, С.1225–1236.

[5] Капорин И.Е. О предобусловливании и распараллеливании метода сопряженных градиентов // В кн: *Ортега Дж.* Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1990. С.343–355.

[6] Капорин И.Е. Итерационное решение систем линейных уравнений с использованием неполной обратной треугольной факторизации // В кн: Прямые и обратные задачи математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1991. С. 71–77.
(перевод: I. E. Kaporin. Iterative solution of systems of linear equations using incomplete inverse triangular factorization. Computational Mathematics and Modeling vol.4, no.1 (1993) P.28–32)

[7] Капорин И.Е. Двухуровневые явные предобусловливания метода сопряженных градиентов // Дифференц. ур-ния. 1992. Т. 28. №2. С. 329–339.

[8] Kaporin, I.E. Explicitly preconditioned conjugate gradient method for the solution of nonsymmetric linear systems // Int. J. Computer Math., 1992, V.40, P.169–187.

[9] Капорин И.Е. Оценки границ спектра двусторонних явных предобусловливаний // Вестн. МГУ. Вып.15. Вычисл. матем. и кибернетика, 1993. Т.2, С.28–42.

[10] Капорин И.Е. Оптимизация алгоритмов метода сопряженных градиентов. // В кн: Математические модели и оптимизация вычислительных алгоритмов. М.: Изд-во МГУ, 1994. С. 50–62.
(перевод: I. E. Kaporin, Optimization of conjugate gradient algorithms, Computational Mathematics and Modeling 1994, V.5, no.2, P.139–147)

[11] Kaporin, I.E. New convergence results and preconditioning strategies for the conjugate gradient method // Numer. Linear Algebra with Appls., V.1, no.2, 1994, P.179–210.

[12] Kaporin, I.E. High quality preconditioning of a general symmetric positive matrix based on its $U^TU+U^TR+R^TU$-decomposition // Numerical Linear Algebra Appl., 1998, V.5, P.484–509.

[13] Kaporin, I.E. Second order incomplete Cholesky preconditionings for the CG method // in: Proc. of IMMB'98, Iterative solution methods for the elasticity equations as arising in Mechanics and Biomechanics, Nijmengen, The Netherlands, Sept. 28-30, 1998, P.47–49.

[14] Еремин А.Ю., Капорин И.Е. Влияние наибольших собственных значений на численную сходимость метода сопряженных градиентов, Численные методы и вопросы организации вычислений. XIII, Зап. научн. сем. ПОМИ, 248, ПОМИ, СПб., 1998, С.5-16. (перевод: A. Yu. Yeremin and I. E. Kaporin. The influence of isolated largest eigenvalues on the numerical convergence of the CG method. Journal of Mathematical Sciences 2000, V.101, no.4, P.3231–3236)

[15] Kaporin,I.E. and Konshin,I.N. Parallel solution of large sparse SPD linear systems based on overlapping domain decomposition // in: Parallel Computing Technologies (Ed. V.Malyshkin), Proceedings of the 5th International Parallel Computing Technologies Conference (PaCT-99), St.-Petersburg, Russia, September 6-10, 1999. Lecture Notes in Computer Science, Vol. 1662, Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New-York, 1999, P.436–445.

[16] Kaporin, I.E. Optimizing the $U^TU + U^TR + R^TU$-decomposition based Conjugate Gradient preconditionings // Rep.0030, November 2000, Department of Mathematics, Catholic University of Nijmegen, Nijmegen, The Netherlands, 16p.

[17] Axelsson O., Kaporin I., Konshin I., Kucherov A., Neytcheva M., Polman B., Yeremin A. Comparison of algebraic solution methods on a set of benchmark problems in linear elasticity // Tech. Report of Department of Mathematics, University of Nijmegen, The Netherlands, 2000, 89p.

[18] Axelsson O., Kaporin I. On the sublinear and superlinear rate of convergence of conjugate gradient methods // Numerical Algorithms, 2000, V.25, P.1–22.

[19] Капорин И.Е., Коньшин И.Н. Параллельное решение симметричных положительно-определенных систем на основе перекрывающегося разбиения на блоки // Журн. Вычисл. Матем. и Матем. Физ. 2001, Т.41, С.481–493.

[20] Axellson O., Kaporin I. Optimizing two-level preconditionings for the conjugate gradient method // Rep.0116, August 2001, Department of Mathematics, Catholic University of Nijmegen, Nijmegen, The Netherlands, 21p.

[21] Kaporin I.E. Using the Modified 2nd Order IC Decomposition as the Conjugate Gradient Preconditioning // In: Proc. of PRISM Conference, 20–23 May. 2001, Nijmegen, The Netherlands.

[22] Kaporin I.E., Konshin I.N. A parallel block overlap preconditioning with inexact submatrix inversion for linear elasticity problems // Numerical Linear Algebra with Applications, 2002, V.9, no.2, P.141–162.

[23] Kaporin I.E. Using the Modified 2nd Order Incomplete Cholesky Decomposition as the Conjugate Gradient Preconditioning // Numerical Linear Algebra with Applications, 2002, V.9, P.401–408.

[24] Kaporin I., Konshin I.N. Parallel Conjugate Gradient Preconditioning via Incomplete Cholesky of overlapping Submatrices // In: Book of Abstracts, Parallel Computational Fluid Dynamics, May 13–15, 2003, Moscow, Russia, P.52–54.

[25] Капорин И.Е., Коньшин И.Н. Параллельное решение линейных систем при использовании приближенной факторизации перекрывающихся блоков. // В кн.: "Математическое моделирование. Проблемы и результаты." (Ред. О.М.Белоцерковский, В.А.Гущин) Наука, Москва, 2003, С.308–319.

[26] Kaporin I. Superlinear convergence in minimum residual iterations // Numerical Linear Algebra with Applications, 2005, V.12, P.453–470.

[27] Капорин И.Е., Коньшин И.Н. Постфильтрация множителей IC2-разложения для балансировки параллельного предобусловливания. // Ж. Выч. Мат. Мат. Физ., 2009, Т.49, №6, С.940–957.

[28] Kaporin I.E., Konshin I.N. Load balancing of parallel block overlapped incomplete Cholesky preconditioning. // Lecture Notes in Computer Science, Vol. 5698, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2009, P.304–315.

Подписано в печать 26.08.2011 Формат 60x84 1/16
Объем 1,33 п. л. Тираж 100 экз. Заказ № 785

Типография издательства «Фолиум»
127238, Москва, Дмитровское ш., 58